Chapter 10 實驗設計簡介

10.1 基本原理

實驗可有多種不同的因子組合(factor level combinations)，又稱為處理(treatments)。

實驗設計：設計及收集所關心的觀測值(y_i)以研究各可能因子對品質特性的影響。

分析各因子效果的方法：

早期常被使用的一種方法是一次變換一個因子水準(one factor at a time)的方法。

No.	A	B	C	Y
1	1	1	1	y_1
2	2	1	1	y_2
3	2	2	1	y_3
4	2	2	2	y_4

$y_2 - y_1$：A 因子的效果

$y_3 - y_2$： B 因子的效果

$y_4 - y_3$： C 因子的效果

優點：簡單

缺點：其他因子水準固定不變，每一個因子水準的重複次數並不相同，因此實驗是不平衡的(unbalance)

因子效果是可靠的效果

：是指該因子效果具有高的再現性(reproducibility)，也就是說，即使其他因子水準有所改變，該因子對於實驗的影響是一致的。

若實驗設計是考慮所有可能的因子水準組合，則此設計稱為全因子設計(full factorial design); 若實驗設計本身由於成本的限制（或其他原因），只考慮一完整實驗的其中一部份進行實驗，則此實驗稱為部分因子實驗設計(fractional factorial design)。

$$\text{Design Of Experimental} \begin{cases} \text{Full factorial design} \\ \text{Fractional factorial design} \end{cases}$$

10.2 全因子實驗

全因子實驗的目的是為檢視一產品（製程），其含有一些重要的設計因子對系統的影響程度，以便決定最佳因子水準組合。對於 k 個因子，若每個因子可設定 2 個水準，這樣的設計稱為 2^k 設計。

範例 1：

2^2 design　　$+$: 高　　$-$: 低

No.	A	B	AB	y_i
1	-	-	+	30
2	+	-	-	50
3	-	+	-	60
4	+	+	+	20

$$\bar{y}(A_-) = \frac{y_1 + y_3}{2} = \frac{30+60}{2} = 45;$$

$$\bar{y}(A_+) = \frac{y_2 + y_4}{2} = \frac{50+20}{2} = 35$$

當因子 A 從“—”水準改變至“+”水準，其平均觀測值減少 10 $(45 \to 35)$，即因子 A 對於輸出回應值的效果(The effect of factor A on the response)為-10。

$$y(A) = [(-30) + 50 + (-60) + 20] = -20$$

$$\bar{y}(A) = \frac{y(A)}{2 \cdot 1} = \frac{-20}{2} = -10$$

註：

2:：表示各因子水準實驗次數；

1：表示每因子組合的觀測值個數。

因此，A 因子的效果 $= \dfrac{1}{2 \times n}\left[(-1) + a + (-b) + ab\right]$

B 因子的效果 $= \dfrac{1}{2 \times n}\left[(-1) + (-a) + b + ab\right]$

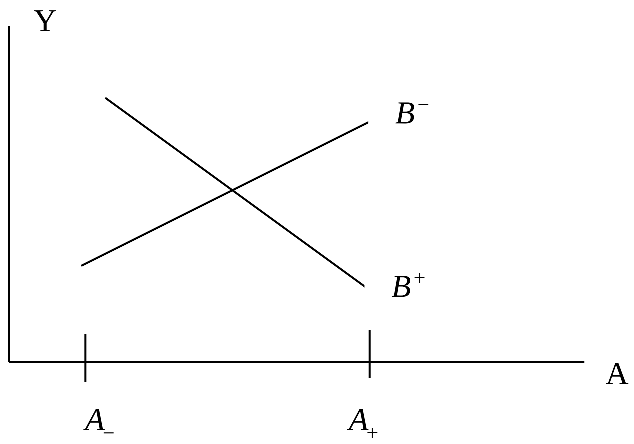
AB 因子的效果 $= \dfrac{1}{2 \times n}\left[(1) + (-a) + (-b) + ab\right]$

若因子 A 的效果隨著 B 因子水準之改變而產生變化，則稱因子 A 和因子 B 之間存在交互作用(interaction)。

$$\text{A 因子的效果} = \frac{1}{2\times 1}[-30+50-60+20] = -10$$

$$\text{B 因子的效果} = \frac{1}{2\times 1}[-30-50+60+20] = 0$$

$$\text{AB 因子的效果} = \frac{1}{2\times 1}[30-50-60+20] = -30$$



直線相交：表示兩因子間存在交互作用

範例 2：

實驗有三個因子，每因子皆為 2 水準。依據標準順序 (Standard order)， 則實驗配置符號表如下所示：

2^3 符號表

A	B	C	AB	AC	BC	ABC	Y
-	-	-	+	+	+	-	(1)
+	-	-	-	-	+	+	(a)
-	+	-	-	+	-	+	(b)
+	+	-	+	-	-	-	(ab)
-	-	+	+	-	-	+	(c)
+	-	+	-	+	-	-	(ac)
-	+	+	-	-	+	-	(bc)
+	+	+	+	+	+	+	(abc)

$$\text{A 因子的效果} = \frac{1}{4\times 1}[(-1)+a+(-b)+ab+(-c)+ac+(-bc)+abc]$$

$$\text{B 因子的效果} = \frac{1}{4\times 1}[(-1)+(-a)+b+ab+(-c)+(-ac)+bc+abc]$$

AB 因子的效果$=\frac{1}{4\times 1}\left[1+(-a)+(-b)+ab+c+(-ac)+(-bc)+abc\right]$

變異數分析(Analysis of Variance; ANOVA)

變異數分析表(ANOVA table)：可用來總結實驗的結果，假設實驗因子數為k，則變異數分析表為：

$H_0:\mu_1=\mu_2=\mu_3=\cdots=\mu_k$

H_1: At least one μ_i not equal

Source	*S.S.*	$d.f$	*M.S.*	*F-ratio*
Treatment	*SSR*	$k-1$	$\frac{SSR}{k-1}$	$\frac{MSR}{MSE}$
Error	*SSE*	$N-k$	$\frac{SSE}{N-k}$	
Total	SST	$N-1$		

$S.S.$: The sum of squares (平方和)

$d.f$: The degree of freedom (自由度)

$M.S.$: The mean of squares (均方)

$F-ratio$:用來測試對應的變異來源是否顯著，若$F-ration<F_{(1-\alpha,k-1,N-k)}$，則未拒絕(non-reject)$H_0$的假設。

$SST=\sum\sum y_{ij}{}^2-\frac{(\sum\sum y_{ij})^2}{N}$;

$SSR=\sum n(y_{ij}-\overline{y}_{i\cdot})^2$;

$SSE=SST-SSR$

Yates Method

當使用 Yates method 時，其因子水準組合必須以標準順序 (Standard order) 寫出。

Yates method 的步驟：

步驟 1：將因子水準組合及其對應的觀測值總和各列成一行，並定義總和行為第(0)行。

步驟 2：構建行 (1), (2),….,(k) 如下：

行(i)的上半部，由前一行($i-1$)之相鄰二數兩兩相加而得；行(i)的下半部，由前一行($i-1$)之相鄰二數兩兩相減(後一數值減前一數值)而得。

步驟 3：第 k 行的第一個數值，為此實驗之所有觀測值的總和。

主效果和交互作用效果為第 k 行的數值除以 $N(=n\cdot 2^{k-1})$；各因子的平方和為第 k 行的數值平方除以 $N(=n\cdot 2^{k})$

範例 3：某化學反應擬檢定三個因子 (A, B, C)，及其交互作用在反應過程中的效果。假設各因子皆含二 2 個水準，每一個因子水準組合各收集 4 個觀測值，收集資料如下：

A	B	C	Obsevations				
			y_1	y_2	y_3	y_4	$\sum y_i$
-	-	-	9	4	12	6	31
+	-	-	7	8	7	1	23
-	+	-	8	9	11	16	44
+	+	-	10	15	9	7	41
-	-	+	1	4	7	4	16
+	-	+	0	1	7	3	11
-	+	+	5	9	6	6	26
+	+	+	6	7	5	3	21

Yates method ($k=3$)

因子水準組合	觀測值總數 ($\sum y_i$)	(1)	(2)	(3)	效果名稱	效果估計 $=\dfrac{k \;\; value}{n\times 2^{k-1}}$	平方和 $=\dfrac{(k \;\; value)^2}{n\times 2^k}$
(1)	31	54	139	213	I	—	—
(a)	23	85	74	-21	A	-1.31	13.78
(b)	44	27	-11	51	B	3.19	81.28
(ab)	41	47	-10	5	AB	0.31	0.78
(c)	16	-8	31	-65	C	-4.06	132.03
(ac)	11	-3	20	1	AC	0.06	0.03
(bc)	26	-5	5	-11	BC	-0.69	3.78
(abc)	21	-5	0	-5	ABC	-0.31	0.78

$$SST=\sum y_{ij}{}^2-\frac{(\sum y_{ij})^2}{N}=(9^2+7^2+\ldots+3^2)-\frac{(213)^2}{32}=437.22$$

$$\begin{aligned}SSE&=SST-(SS_A+SS_B+SS_{AB}+SS_C+SS_{AC}+SS_{BC}+SS_{ABC})\\&=437.22-(13.78+81.28+\ldots+0.78)\\&=204.76\end{aligned}$$

ANOVA Table

Source	S.S.	$d.f$	M.S.	$F-ratio$
A	13.78	1	13.78	1.62
B	81.28	1	81.28	9.53
AB	0.78	1	0.78	0.09
C	132.03	1	132.03	15.48
AC	0.03	1	0.03	0.00
BC	3.78	1	3.78	0.44
ABC	0.28	1	0.28	0.09
Error	204.76	24	8.53	
Total	437.22	31		

設顯著水準 $\alpha=0.05$

經查表 $F_{(0.95,1,24)}=4.26$

由變異數分析表可知，因子 B 和 C 具有顯著的效果，沒有顯著的交互作用發

生，如果化學反應的輸出值是越大越好，則將 B 因子設在較高的水準，而將 C 因子設在較低的水準。

10.3 部分實驗設計

在全因子設計中，我們可以獲得主效果和所有可能交互作用效果。然而，在實務上有些高次交互作用 (Higher-order interaction)不存在或可忽略，對於 2^k 設計，僅進行 $\frac{1}{2}$ 的實驗，稱為 2^{k-1} 設計；若僅進行 $\frac{1}{4}$ 次數的實驗，則稱為 2^{k-2} 設計。

部分實驗設計：

通常是在實驗初期，先利用部分因子實驗法找出重要因子，然後在針對這些重要因子進行分析。

例如：

$k=4$ ， 每因子皆為 2 個水準，全因子實驗次數為 $2^4=16$ 次，若採用 2^{k-1} 設計，則實驗次數 $=\frac{16}{2}=8$ 次。

No.	A	B	C	D (=ABC)
1	−	−	−	−
2	+	−	−	+
3	−	+	−	+
4	+	+	−	−
5	−	−	+	+
6	+	−	+	−
7	−	+	+	−
8	+	+	+	+

第四行的符號同時用以表示因子 D 和交互作用 ABC，很明顯地主效果(D)和相互作用效果 ABC 混在一起，進行此符號表實驗時，D 和 ABC 的個別效果無法求出，而只能找出 D 和 ABC 的混合效果，這種現象稱為交絡 (confounding)。

交絡 (confounding)：兩種或兩種以上的效果在實驗中無法被區分，此現象稱為交絡。

如果 ABC 的交互作用效果很小 (或可忽略)，那麼所求出之第四行的效果即可用來表示因子 D 的效果，這就是部分因子實驗的真諦。

設計產生器 (Design generator)：任何一行乘以自己將產生全是“＋”符號的一

行，我們將全是“＋”符號的行定義為 I (identity)。

$$
\begin{aligned}
A &= A \times I \\
&= A \times ABCD \\
&= BCD
\end{aligned}
$$

則 A 和 BCD 互為別名 (Alias)

因子水準組合	A	B	C	D
(1)	—	—	—	—
(a)	+	—	—	—
(b)	—	+	—	—
(ab)	+	+	—	—
(c)	—	—	+	—
(ac)	+	—	+	—
(bc)	—	+	+	—
(abc)	+	+	+	—
(d)	—	—	—	+
(ad)	+	—	—	+
(bd)	—	+	—	+
(abd)	+	+	—	+
(cd)	—	—	+	+
(acd)	+	—	+	+
(bcd)	—	+	+	+
$(abcd)$	+	+	+	+

設取“+”進行實驗

因子水準組合	A	B	C	D
(1)	—	—	—	—
(ab)	+	+	—	—
(ac)	+	—	+	—
(bc)	—	+	+	—
$(ad = a)$	+	—	—	+
$(bd = b)$	—	+	—	+
$(cd = c)$	—	—	+	+
$(abcd = abc)$	+	+	+	+

範例 4：利用 Yates method 進行資料分析

某製造公司檢討其產品品質之影響因素可能來自作業員 (A)、材料(B)、機器(C)和加工方法(D)，各因子均含有 2 個水準。假設三因子以上的交互作用可忽略不計，今以 2^{4-1} 設計進行實驗，結果如下表所示：

因子組合水準	因子				y_i
	A	B	C	D	
(1)	—	—	—	—	46
(ad)	+	—	—	+	100
(bd)	—	+	—	+	50
(ab)	+	+	—	—	65
(cd)	—	—	+	+	75
(ac)	+	—	+		65
(bc)	—	+	+		75
$(abcd)$	+	+	+	+	95

Yates Method

因子水準組合	y_i	(1)	(2)	(3)	效果名稱	效果估計	平方和
(1)	46	146	261	571	I	—	—
(ad)	100	115	310	79	A+BCD	19.75	780.13
(bd)	50	140	69	-1	B+ACD	-0.25	0.13
(ab)	65	170	10	-9	AB+CD	-2.25	10.13
(cd)	75	54	-31	49	C+ABD	12.25	300.13
(ac)	65	15	30	-59	AC+BD	-14.75	435.13
(bc)	75	-10	-39	61	BC+AD	15.25	465.13
$(abcd)$	95	20	30	69	ABC+D	17.25	595.13

$$SST = \sum\sum {y_{ij}}^2 - \frac{(\sum\sum y_{ij})^2}{N}$$

$$= (46^2 + 100^2 + \cdots + 95^2) - \frac{(571)^2}{8}$$

$$= 2585.88$$

因為各處理組合僅收集一個觀測值，所以 *SSE* 的自由度無法獲得。因此，將較小的因子平方和予以合併以計算 *SSE* 的自由度。

ANOVA Table

Source	*S.S.*	*d.f.*	*M.S.*	*F − ratio*
A	780.13	1	780.13	152.07
B	0.13*	1	—	—
C	300.13	1	300.13	58.50
D	595.13	1	595.13	116.01
AB	10.13*	1	—	—
AC	435.13	1	435.13	84.82
AD	465.13	1	465.13	90.67
Pool Error	10.26	2	5.13	
Total	2585.88	7		

經查表，$F_{(0.95,1,2)} = 18.51$

對於2^k全因子實驗設計，若僅進行其中之$\frac{1}{2^p}$次實驗，則稱為2^{k-p}部分因子實驗設計。

進行部分因子實驗設計步驟：
訂出定義關係→計算出別名→製作正負符號表→依據正負符號表隨機進行實驗

訂出定義關係，就是要決定實驗的解析度 (resolution)，Box and Hunter 將常用解析度分成三類：

1. 解析度 III
   :主效果之間不互為別名，但主效果與二因子交互作用效果之間互為別名。

2. 解析度 IV
   :主效果與二因子交互作用效果之間不互為別名，但二因子交互作用效果與其他二因子交互作用效果互為別名。

3. 解析度 V
   : 主效果與二因子交互作用效果之間不互為別名，但二因子交互作用效果與三因子交互作用效果互為別名。

10.4 變異數分析公式

1. 總平方和（Total of Sum Squares ； TSS）

$$SST=\sum\sum {y_{ij}}^2-CF$$

$$CF=\frac{(\sum\sum y_{ij})^2}{N} \qquad \text{CF : Corrtion factor}$$

2. 主效果的平方和

：對於一因子 A，具有 P 個水準，且每一水準有 m 個觀測值，那麼因子的平方和為 $SS_A=\dfrac{(A_1)^2+(A_2)^2+\cdots+(A_P)^2}{m}-CF$

其中 A_i 為因子 A 在水準 i 之觀測值總和，若每一水準的觀測值數目不同，設為 m_i ，$i=1,2,\cdots,p$ ，則因子平方和為

$$SS_A=[\frac{(A_1)^2}{m_1}+\frac{(A_2)^2}{m_2}+\cdots+\frac{(A_p)^2}{m_p}]-CF$$

對於一具有 p 水準的因子其自由度為 $p-1$

3. 交互作用的平方和

假設 A 因子具有 a 個水準，B 因子具有 b 個水準，且每一水準有 m 個觀測值，那麼 A 和 B 之交互作用 $A\times B$ 的平方和為：

$$SS_{AB}=\frac{(A_1B_1)^2+(A_1B_2)^2+\cdots+(A_1B_b)^2+(A_2B_1)^2+\cdots+(A_aB_b)^2}{m}-SS_A-SS_B-CF$$

SS_{AB}所對應的自由度為$(a-1)\times(b-1)$

4. 誤差平方和

$$SSE=SST-\underbrace{(SS_A+SS_B+\cdots)}_{\text{主效果平方和}}-\underbrace{(SS_{AB}+SS_{AC}+\cdots)}_{\text{交互作用效果平方和}}$$

範例 5

No.	設計因子					y_i				
	A	B	C	D	AB					
1	—	—	—	—	+	10	10	7	10	5
2	+	—	—	+	—	14	14	11	11	11
3	—	+	—	+	—	7	8	7	7	8
4	+	+	—	—	+	8	8	10	8	10
5	—	—	+	+	+	11	12	11	6	6
6	+	—	+	—	—	9	13	13	8	9
7	—	+	+	—	—	8	8	6	4	5
8	+	+	+	+	+	8	10	9	10	8

$$SST = \sum\sum {y_{ij}}^2 - CF \qquad CF = \frac{(\sum\sum y_{ij})^2}{N} = \frac{(358)^2}{40} = 3204.1$$

$$= 3432 - 3204.1$$

$$= 227.9$$

$$SS_A = \frac{(A_-)^2 + (A_+)^2}{4\times 5} = \frac{(10+10+\cdots+5)^2 + (14+14+\cdots+8)^2}{20} - CF$$

$$= 52.9$$

相同地，$SS_B = 48.4$ ，$SS_C = 2.5$ ，$SS_D = 10$

$$SS_{AB} = \frac{(A_-B_-)^2 + (A_-B_+)^2 + (A_+B_-)^2 + (A_+B_+)^2}{2\times 5} - (SS_A + SS_B) - CF$$

$$= 0.4$$

$$SSE = SST - (SS_A + SS_B + SS_C + SS_D) - SS_{AB} - CF$$

$$= 113.7$$

ANOVA Table

$Source$	$S.S.$	$d.f.$	$M.S.$	$F-ratio$
SS_A	52.9	1	52.9	15.82
SS_B	48.4	1	48.4	14.47
SS_C	2.5	1	2.5	0.75
SS_D	10	1	10	2.99
SS_{AB}	0.4	1	0.4	0.12
SSE	113.7	34	3.344	
SST	227.9	39		

經查表，$F_{(0.95,1,34)} = 4.13$

因此，因子 A 和因子 B 具有顯著性，此結論可信度 95%

練習題

利用 *Yates Method* 計算下表中各因子的效果與平方和

處理組合	因子			y_i
	A	B	C	
(1)	－	－	－	3
(a)	+	－	－	17
(b)	－	+	－	7
(ab)	+	+	－	25
(c)	－	－	+	10
(ac)	+	－	+	20
(bc)	－	+	+	10
(abc)	+	+	+	30